

量子渦運動の数値計算のための新手法

[1] 要旨

ゲージ場下の量子現象（量子渦の発生・運動・相互作用など）を記述する時間発展方程式を、効率よく高い精度で解くことができる新しい陽的数値積分法が提案された。この手法は数値的安定性が高いことが大きな特徴のひとつである。提案された手法は、超伝導体内の量子化磁束や回転超流体内の量子渦の振る舞いに関する数値計算に適用され、その有効性が確認された。

[2] 本文

第2種超伝導体内の量子化磁束および回転超流体内の量子渦の振る舞いを記述する非線形複素偏微分方程式、すなわち時間依存ギンツブルグ・ランダウ（TDGL）方程式や時間依存グロス・ピタエフスキー（TDGP）方程式（非線形シュレディンガー方程式）を効率よく数値的に解くことは工学的にも理学的にも重要である。しかしながら、これまで上記方程式を数値的に解くための高安定な陽的数値積分法がなかったために時間刻み幅を小さくするか、時間刻み幅を比較的大きくとることができる陰的解法が用いられることが多く、単位シミュレーション時間当たりの計算量を小さくすることは困難であった。近年は GPU 並列処理による数値演算高速化のためのテクノロジーが急速に発達してきている。並列化による高速化には、ハードウェア構造との相性のよさから陽的解法が適しているため、高安定かつ記憶領域最小の陽的数値積分法が望まれていた。

最近、有明工業高等専門学校メンバーを中心とする研究グループは、ゲージ場存在下での複素偏微分方程式を解くための高安定な陽的数値積分法を提案した。この成果は、日本物理学会が発行する英文誌 *Journal of the Physical Society of Japan (JPSJ)* の 2020 年 5 月号に掲載された。

この論文で提案された手法は、空間離散化格子を2つの副格子からなる格子とみなすことによって高次元複素ベクトルを導出し、それらにアフィン変換を逐次的に作用させて時間発展させていく形で構成された陽的数値積分法である（著者らは AFI: Affine Integrator と呼んでいる）。本手法は時間離散化の際に、位相空間に関する微分演算の行列表現を導く過程で自然に得られた手法である。このような数学的簡潔性を利用して AFI の数値的安定性などを理論的に議論することが可能となったのである。

また、この論文では TDGL 方程式や TDGP 方程式を実際に数値的に解いてみせることで AFI の有効性がデモンストレーションされている。図1および2に数値計算例を示す。また、よく用いられている陽的解法のひとつである4次精度のルンゲ・クッタ法（RK4）との比較検討もなされている。計算のための記憶領域について RK4 ではシミュレーション領域の2倍は最低必要であることにに対し AFI では最小（1倍）でありデータ転送過程がボトルネックとなる傾向にある並列処理において本手法は大変有利である。AFI は4次精度への拡張が可能であり、このとき計算精度、安定性、計算量、記憶領域の各観点において AFI は RK4 に匹敵するか凌駕することも示唆されている。さらに、AFI は、線形無散逸系（シュレディンガー方程式）に適用された場合、全エネルギーを厳密に（丸め誤差レベルで）保存する。このことも理論的・数値的に本論文で示されている。

この論文で提案された手法により大規模量子シミュレーションを様々なパラメータで繰り返し試行することが容易になる。それゆえ本手法は、大電流超伝導送電線のための材料設計、超高速超低消費電力の超伝導デバイスの開発、量子コンピュータのためのデバイスの最適設計、磁場（ゲージ場）に関わる新奇量子デバイスの開発や超流体の量子渦構造の数値的研究による乱流現象の解明など、量子工学・物理学の分野に大きく貢献するであろう。今後の研究の展開が期待される。

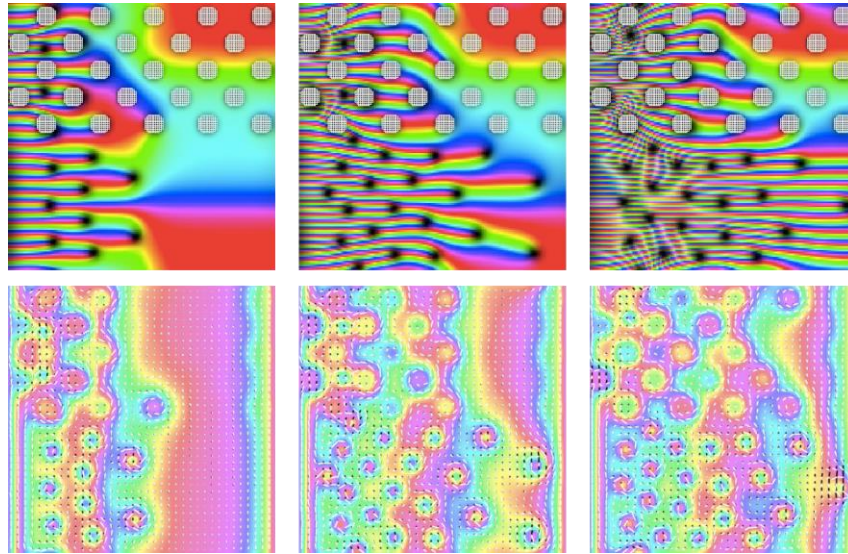


図 1. 超伝導体における量子渦の時間発展の計算例．上図の明度は超伝導電子に関する波動関数の振幅，色相は位相に対応する．下図の色相は紙面に垂直方向の磁場強度，白線は電流密度，黒線は電場を示す．時間経過とともに左側の境界から侵入した量子渦すなわち量子化された磁束は印加電流によるローレンツ力に駆動されて右側に流れていく．なおシミュレーション領域の上半分では磁束のピン止め効果を再現している．

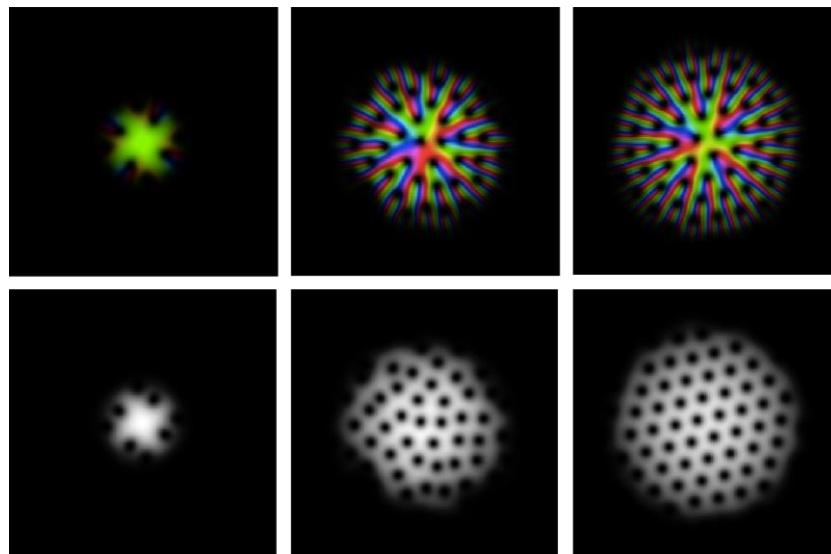


図 2. 回転超流体における量子渦の時間発展の計算例．上図の明度は超流体分子に関する波動関数の振幅，色相は位相に対応する．下図は色を取り除いたもの．時間が経つにつれて量子渦の三角格子が形成されていく様子が分かる．なお，図 1 および 2 の関連動画は <https://www.youtube.com/user/pftetsuyaGPU/videos> に公開されている．

原論文(4 月 27 日公開済)

Explicit Integrators Based on a Bipartite Lattice and a Pair of Affine Transformations to Solve Quantum Equations with Gauge Fields

T. Matsuno, E. S. Otabe, and Y. Mawatari, J. Phys. Soc. Jpn. **89**, 054006 (2020).

<情報提供：松野哲也（有明工業高等専門学校）>